

ся практически мгновенно по всему объему сырья. Тогда как плотность изменяется от 1,1922 г/см<sup>3</sup> до 1,1779 г/см<sup>3</sup>.

В результате проведенных исследований было установлено, что оптимальными условиями обработки каменноугольной смолы низкотемпературной плазмы работа выхода электрона проводника 4,3эВ (Al), расстояние 0,5 см, продолжительность обработки 5 мин.

Таким образом, можно констатировать, что обработка низкотемпературной плазмы приводит к структурированию каменноугольной смолы и понижению ее плотности.

1. Baikenov M. I., Omarbekov T.B., Amerkhanova Sh.K., Baikenova G.G., Uali A.S., and etc. Effect of Cavitation on the Properties of Coal-Tar Pitch as Studied by Gas-Liquid Chromatography //Solid Fuel Chemistry, 2008, Vol. 42, No. 1, P. 35–38.

2. Семиохин И.А., Элементарные процессы в низкотемпературной плазме. - М: Изд-в Моск. ун-та, 1988. - 142 с.

3. Ашмарин И.П., Васильев Н.Н. Быстрые методы статистической обработки и планирования экспериментов. - Л.: Изд-во ЛГУ, 1972. - 80 с

4. ГОСТ 3900-85

## **ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И ЭНЕРГЕТИКИ L- И DL- МЕТИОНИНА**

*Тюнина В.В., Гиричев Г.В., Краснов А.В., Балушков И.С.*

Ивановский государственный химико-технологический университет  
153000, г. Иваново, пр. Ф. Энгельса, д. 7

Изучение структуры и физико-химических свойств аминокислот имеет большое значение при изучении высокомолекулярных соединений той же природы. К числу важнейших характеристик органических веществ относится энтальпия сублимации ( $\Delta_{\text{subl}}H$ ), экспериментальное нахождение которой часто осложняется процессами разложения соединений. Также довольно остро стоит проблема поиска и адекватной идентификации конформеров аминокислот, поскольку данные молекулы имеют большое число вращательных степеней свободы и множество конформеров, не сильно различающихся по энергии. Сведения о структуре и колебательном спектре этих соединений необходимы для построения трехмерной модели белка и определения основных реакционных центров в нем.

В качестве объектов исследования представлены две серосодержащие аминокислоты – L-метионин (L-Met) и DL-метионин (DL-Met).

Для изучения процесса сублимации этих биосоединений использован эффузионный метод Кнудсена с масс-спектрометрическим контролем состава пара на приборе МИ 1201, модифицированном для термодинамических исследований, с диапазоном масс 0-1400 а.е.м. при энергии ионизирующих электронов 40 эВ. Масс-спектры этих аминокислот оказались идентичны по распределению массовых чисел, небольшие различия наблюдались в распределении интенсивностей ионных токов. Наиболее типичны для всех аминокислот направления фрагментации - элиминирование боковой цепи R, карбоксильной группы и регистрация ионов со стехиометрией  $\text{COOH}^+$ ,  $\text{NH}_2\text{CHCO}^+$ ,  $\text{NH}_2\text{CH}^+$ . Наибольшей интенсивностью в спектрах характеризовались ионы  $\text{CH}_2\text{SCH}_3^+$ ,  $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{SCH}_3^+$  и молекулярный ион. Обработка температурных зависимостей ионных токов по второму закону термодинамики позволила определить энтальпии сублимации изучаемых аминокислот. На основе использования уравнения Кирхгоффа осуществлено приведение энтальпии сублимации к стандартным значениям ( $p = 1 \text{ атм}$ ,  $T = 298 \text{ К}$ ). Таким образом, энтальпии сублимации аминокислот имеют следующие значения:  $\Delta H_{\text{sub}}^{298}(\text{L-Met}) = 143 \pm 6 \text{ кДж/моль}$ ,  $\Delta H_{\text{sub}}^{298}(\text{DL-Met}) = 148 \pm 3 \text{ кДж/моль}$ .

Рассмотрено конформационное поведение метионина. Конформационный поиск проведен полуэмпирическим методом AM1. На данном этапе исследования определены 16 наиболее стабильных конформеров для этой аминокислоты, и они исследованы на более высоком уровне теории. Квантово-химические вычисления проведены с помощью пакета программ Gaussian 03. Оптимизация геометрии молекул, их энергии и частоты колебаний рассчитаны по теории функционала плотности. Для этого был использован гибридный функционал B3LYP с базисами 6-31G\*\*, 6-31++G\*\* и cc-pVTZ. Для трех конформеров, имеющих наименьшие значения относительной энергии (до 1 кДж/моль), проведен NBO-анализ и установлено наличие внутримолекулярной водородной связи в одном конформере Met.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Гранта РФФИ № 12-03-31758мол\_а.*